

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Berkembangnya ilmu pengetahuan sejalan dengan berkembangnya teknologi dan informasi pada era saat ini yang merupakan kebutuhan primer bagi semua orang untuk mendapatkan informasi mengenai dunia luar yang sudah berkembang dan bahkan lebih maju. Seiring berjalannya waktu, ilmu pengetahuan semakin kompleks dan fokus pada pokok permasalahan yang ada seperti pada ilmu kimia yang sekarang sudah berkembang dengan sub pokok pembahasan masing-masing pada bidang keahliannya, misalnya pada ilmu kimia yang mempelajari tentang lingkungan baik dari segi kandungan kimia yang terdapat dalam polusi udara, berbagai pencemaran dan sebagainya.

Disisi lain, diluar *environment chemistry* yang membahas tentang lingkungan, ada juga *computational chemistry* atau yang biasa dikenal dengan kimia komputasi. Istilah kimia komputasi umumnya digunakan pada saat perhitungan matematika pada kimia yang sedang berkembang sehingga dapat diotomatisasi dan diimplementasi pada komputer (David C. Young, 2001). Seperti pada air yang memiliki rumus molekul H_2O dengan kandungan Hidrogen dan Oksigen, jika ditelaah lebih dalam air dapat diikat beberapa unsur yang daya hidrasinya dapat dihitung dengan menggunakan teknologi yang dibuat oleh para ahli kimia dengan menghubungkan perangkat keras dengan teori.

Pada penelitian yang telah dilakukan terdahulu, bahwa dalam tubuh manusia terdapat suatu logam yang memiliki fungsi baik itu menguntungkan ataupun merugikan bagi tubuh (Siu dkk., 2002), sebagai antibodi dan lainnya. Dalam lingkungan baik di udara maupun makanan (Cotruvo dkk., 2011) seperti perak (Ag), kadmium (Cd), arsen (As), merkuri (Hg), nikel (Ni), timbal (Pb) dan seng (Zn) yang merupakan golongan logam berat (Bogdan dkk., 2011) bisa masuk kedalam tubuh manusia maupun hewan.

Logam berat dapat berbentuk padat maupun cair yang massa jenisnya lebih dari 5 gram/cm³ (Alfonds A, dkk., 2006: 93-98). Dalam tubuh makhluk hidup ion logam berat jumlahnya sangat sedikit atau disebut "*trace*". Beberapa mineral *trace* ada yang berupa esensial dan non-esensial. Untuk ion yang bersifat non-esensial sifatnya *toxic* (beracun) bagi makhluk hidup misalnya: ion logam merkuri (Hg), kadmium (Cd), perak (Ag), kromium (Cr) dan timbal (Pb) (Darmono, 2004: 94-96).

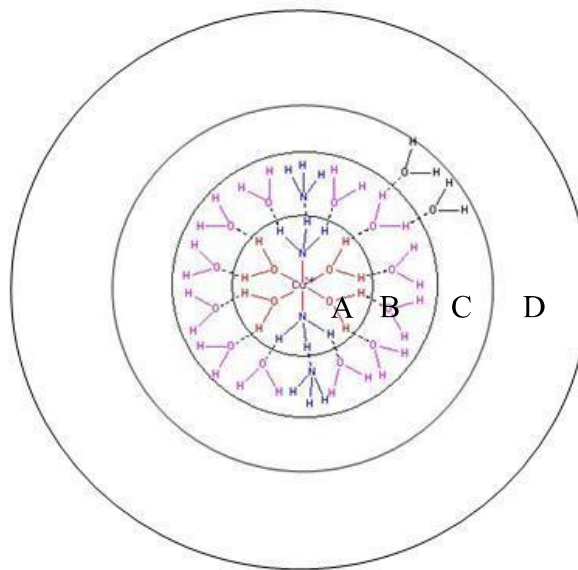
Salah satu dari logam transisi yang termasuk dalam logam berat yaitu perak (Ag) dalam tabel periodik berada pada golongan IB periode 4. Ion perak biasanya terdapat dalam limbah pabrik produksi perak. Limbah yang mengandung perak sangat berbahaya jika dibuang ke lingkungan yang dapat menimbulkan gangguan kesehatan jika masuk kedalam tubuh manusia. Urutan toksisitas Ag adalah sebagai berikut : $Hg^{2+} > Cd^{2+} > Ag^{+} > Ni^{2+} > Pb^{2+} > As^{3+} > Cr^{2+} > Sn^{2+} > Zn^{2+}$ (Darmono, 2001). Pencemaran lingkungan oleh ion Ag^{+} dapat masuk kedalam rantai makanan dan apabila manusia mengkonsumsi makanan yang telah terkontaminasi ion Ag^{+} akan

terakumulasi kemudian dapat mengakibatkan pigmentasi yang disebut argyria. Mengingat bahaya yang ditimbulkan oleh ion Ag maka batas maksimum untuk perak yang diperbolehkan dalam air limbah harus sangat kecil. Berdasarkan Peraturan Menteri Energi dan Sumber Daya Mineral Republik Indonesia No.45 Tahun 2006 tentang baku mutu TCLP (*Toxicity Characteristic Leaching Procedure*) pencemar dalam limbah untuk penentuan karakteristik sifat racun, kandungan perak (Ag) yang diperbolehkan sebesar 40 mg/L (TCLP-A) dan 5,0 mg/L (TCLP-B) (P.55/Menlhk-Setjen/2015).

Tubuh manusia sebagian besar (lebih dari 80%) terdiri dari zat cair, sehingga proses metabolisme dalam tubuh manusia melibatkan solvasi antara zat pelarut dan zat terlarut. Solvasi yang melibatkan pelarut air disebut hidrasi. Karena proses metabolisme dalam tubuh manusia yang sebagian besar adalah air maka senantiasa melibatkan berbagai pelarut baik air maupun non-air. Peristiwa solvasi ion dapat mengakibatkan adanya perubahan dinamika dan modifikasi struktur lokal dari molekul-molekul ligan di sekitar ion.

Penelitian tentang solvasi ion menjadi sangat diperlukan mengingat banyaknya proses kimiawi di alam. Peristiwa solvasi terjadi karena adanya interaksi elektrostatik, terjadinya ikatan hidrogen atau interaksi van der Waals antara molekul solut dan molekul solven.

Penelitian tentang hidrasi ion dalam air sudah banyak dilakukan. Misalnya: Simulasi dinamika molekuler (DM) mekanika kuantum/mechanika molekuler (MK/MM) telah dilakukan terhadap ion Ag^+ (Armunanto, dkk., 2003), ion Cd^{2+} (Wahyuni, 2012), ion Zn^{2+} (Marini, dkk., 1996), ion raksa Hg^{2+} (Kritayakornupong, dkk., 2003), ion rubidium Rb^+ (Hofer, dkk., 2005) dan sebagainya.



Gambar 1. Lapisan pelarut ion; A = lapisan pertama, B = lapisan kedua, C = lapisan ketiga dan D = lapisan fasa ruah

Pada lapisan yang pertama memiliki daya hidrasi yang cukup kuat. Zat terlarut yang berada dalam lapisan pertama merupakan ligan yang terhidrasi dengan ion pusat (kation). Ligan yang berada dalam lapisan pertama dapat berpindah ke lapisan kedua dan sebaliknya membentuk kompleks. Pertukaran ligan dapat mempengaruhi aktivitas. Dengan menggunakan bantuan komputer dan program perangkat lunak yang semakin maju seperti saat ini dapat

menjadi dasar dilakukannya penelitian yang mengkaji lebih dalam mengenai hidrasi ataupun solvasi (Pranowo dan Rode, 2001).

Secara garis besar struktur dan dinamika hidrasi dapat ditentukan melalui eksperimen dan simulasi komputer. Untuk simulasi melalui eksperimen dapat dilakukan dengan memakai peralatan seperti: difraksi sinar-X, difraksi sinar neutron, spektroskopi dan NMR (*Nuclear Magnetic Resonance*). Sedangkan yang menggunakan simulasi dapat dilakukan dengan dua cara yaitu simulasi *Monte Carlo* (MC) dan *Molecular Dynamics* (MD) (Pranowo dan Hetadi, 2011). Simulasi MC dan MD memiliki perbedaan karakter dan menghasilkan informasi yang berbeda. Simulasi MD memberikan informasi mengenai sifat struktur dan dinamika dari sistem, sedangkan pada MC tidak dapat mengamati sifat dinamika hanya saja sifat struktur dalam keadaan stabil, karena metode tidak mengaitkan sifat struktur sebagai fungsi waktu (Armunanto, 2004)

Sistem solvasi ion yang dilakukan bisa pada air, ammonia dan jika melibatkan pelarut air bisa disebut hidrasi. Oleh karena itu penelitian ini dilakukan untuk mengetahui struktur ion perak (Ag^+) mengikat molekul air sebagai ligan. Metode yang dilakukan adalah dinamika molekul mekanika molekul. Prinsip utama pada simulasi DM MM adalah dengan menghitung menggunakan simulasi untuk mengetahui berapa ligan air yang diikat dengan ion Ag^+ .

B. Identifikasi Masalah

Berdasarkan latar belakang, dapat diidentifikasi permasalahan-permasalahan sebagai berikut:

1. Jarak antara ion Ag^+ dengan molekul air (H_2O), $\text{Ag}^+\text{-O}$ maupun $\text{Ag}^+\text{-H}$.
2. Pemilihan basis set yang tepat untuk atom Ag untuk didapatkan hasil yang sesuai data dan eksperimen.
3. Struktur dan dinamika dari ion Ag^+ dengan molekul air.

C. Pembatasan Masalah

Berdasarkan permasalahan yang telah disebutkan, maka perlu dibatasi. Pembatasan masalah dalam penelitian ini adalah:

1. Jarak $\text{Ag}^+\text{-O}$ dan $\text{Ag}^+\text{-H}$ menggunakan simulasi dinamika molekuler mekanika molekuler.
2. Basis set dipilih yang tepat dengan mencocokkan hasil dengan grafik *Lennard-Jones*.

D. Perumusan Masalah

Dari uraian mengenai latar belakang, rumusan masalah yang akan dibahas lebih lanjut, sebagai berikut:

1. Bagaimana struktur hidrasi ion Ag^+ dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler mekanika molekuler?
2. Bagaimana dinamika hidrasi ion Ag^+ dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler mekanika molekuler?

E. Tujuan Penelitian

Dari rumusan masalah diatas, adapun tujuan penelitian ini adalah:

1. Mengetahui struktur hidrasi ion Ag^+ menggunakan simulasi dinamika molekul mekanika molekul.
2. Mengetahui dinamika hidrasi ion Ag^+ menggunakan simulasi dinamika molekul mekanika molekul.

F. Manfaat Penelitian

Hasil penelitian ini diharapkan dapat memberikan sumbangan signifikan bagi pengembangan ilmu dalam bidang kimia komputasi. Dengan dilakukan penelitian ini maka sifat struktur dan dinamika hidrasi Ag^+ dapat diketahui karena sistem yang berukuran mikro dan hanya kimia komputasi yang mampu melakukan perintah tersebut.